Table of Contents

補間(interpolation)と数値積分(Integral)

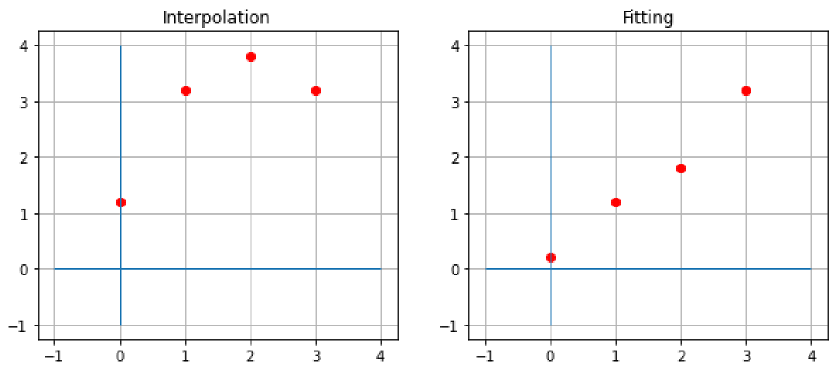
file:/Users/bob/Github/TeamNishitani/jupyter_num_calc/interpolationintegral
https://github.com/daddygongon/jupyter_num_calc/tree/master/notebooks_py

cc by Shigeto R. Nishitani 2017

概要:補間と近似

単純な2次元データについて補間と近似を考える．補間はたんに点を「滑らかに」つなぐことを，近似はある関数にできるだけ近くなるように「フィット」することを言う．補間はIllustratorなどのドロー系ツールで曲線を引くときの，ベジエやスプライン補間の基本となる．本章では補間とそれに密接に関連した積分について述べる．

In [1]:
```
%matplotlib inline

import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np


fig, (axL, axR) = plt.subplots(ncols=2, figsize=(10,4))

x = np.array([0,1,2,3])
y = np.array([1.2,3.2,3.8,3.2])
for i in range(0,4):
    axL.plot(x[i],y[i],'o',color='r')
axL.hlines(0, -1, 4, linewidth=1)
axL.vlines(0, -1, 4, linewidth=1)
axL.set_title('Interpolation')
axL.grid(True)

x = np.array([0,1,2,3])
y = np.array([0.2,1.2,1.8,3.2])
for i in range(0,4):
    axR.plot(x[i],y[i],'o',color='r')
axR.hlines(0, -1, 4, linewidth=1)
axR.vlines(0, -1, 4, linewidth=1)
axR.set_title('Fitting')
axR.grid(True)

# fig.show()
```



多項式補間(polynomial interpolation)

データを単純に多項式で補間する方法を先ず示そう．$N+1$点をN次の多項式でつなぐ．この場合の補間関数は，

$$F(x) = \sum_{i=0}^{N} a_i x^i = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_N x^N$$

である．データの点を$(x_i, \ y_i), i = 0..N$とすると

$$
\begin{aligned}
a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \cdots + a_N x_0^N &= y_0 \\
a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \cdots + a_N x_1^N &= y_1 \\
&\vdots \\
a_0 + a_1 x_N + a_2 x_N^2 + \cdots + a_N x_N^N &= y_N
\end{aligned}
$$

が，係数 a_i を未知数と見なした線形の連立方程式となっている．係数行列は

$$
A = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^N \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^N \\ \vdots & & & & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 & \cdots & x_N^N \end{bmatrix}
$$

となる．a_i と y_i をそれぞれベクトルとみなすと

A と y から a_i を導出：

により未知数ベクトル a_i が求まる．これは単純に，前に紹介した Gauss の消去法や LU 分解で解ける．

Lagrange(ラグランジュ) の内挿公式

多項式補間は手続きが簡単であるため，計算間違いが少なく，プログラムとして組むのに適している．しかし，あまり"みとうし"のよい方法とはいえない．その点，Lagrange(ラグランジュ)の内挿公式は見通しがよい．これは

$$
F(x) = \sum_{k=0}^{N} \frac{\prod_{j \neq k}(x - x_j)}{\prod_{j \neq k}(x_k - x_j)} y_k = \sum_{k=0}^{N} \frac{\frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_N)}{(x-x_k)}}{\frac{(x_k-x_0)(x_k-x_1)\cdots(x_k-x_N)}{(x_k-x_k)}} y_k
$$

と表わされる．数学的に 2つ目の表記は間違っているが，先に割り算を実行すると読み取って欲しい．これは一見複雑に見えるが，単純な発想から出発している．求めたい関数 $F(x)$ を

$$
F(x) = y_0 L_0(x) + y_1 L_1(x) + y_2 L_2(x)
$$

とすると

$$
\begin{array}{lll}
L_0(x_0) = 1 & L_0(x_1) = 0 & L_0(x_2) = 0 \\
L_1(x_0) = 0 & L_1(x_1) = 1 & L_1(x_2) = 0 \\
L_2(x_0) = 0 & L_2(x_1) = 0 & L_2(x_2) = 1
\end{array}
$$

となるように関数 $L_i(x)$ を決めればよい．これを以下のようにとればLagrangeの内挿公式となる．

$L_0(x)$:

$L_1(x)$:

$L_2(x)$:

$F(x)$:

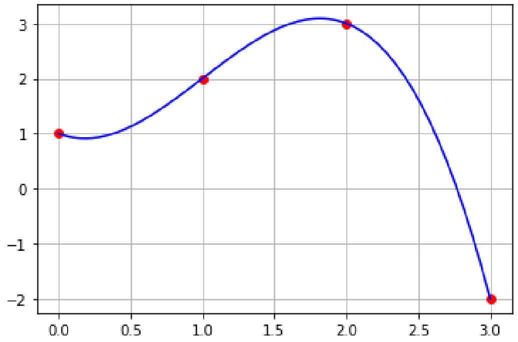
python code

pythonではLagrange補間はinterpolate.lagrangeで用意されている．

In [2]:

```
import numpy as np
from scipy import interpolate
import matplotlib.pyplot as plt

# もとの点
x = np.array([0,1,2,3])
y = np.array([1,2,3,-2])
for i in range(0,4):
    plt.plot(x[i],y[i],'o',color='r')


# Lagrange補間
f = interpolate.lagrange(x,y)
print(f)
x = np.linspace(0,3, 100)
y = f(x)
plt.plot(x, y, color = 'b')

plt.grid()
plt.show()
```

```
   3     2
-1 x + 3 x - 1 x + 1
```



Newton(ニュートン) の差分商公式

もう一つ有名なNewton(ニュートン) の内挿公式は,

$$\begin{aligned} F(x) &= F(x_0) + (x-x_0) f_1 \lfloor x_0, x_1 \rfloor + (x-x_0)(x-x_1) f_2 \lfloor x_0, x_1, x_2 \rfloor + \\ & \cdots + \prod_{i=0}^{n-1} (x-x_i)\, f_n \lfloor x_0, x_1, \cdots, x_n \rfloor \end{aligned}$$

となる．ここで$f_i \lfloor\ \rfloor$ は次のような関数を意味していて,

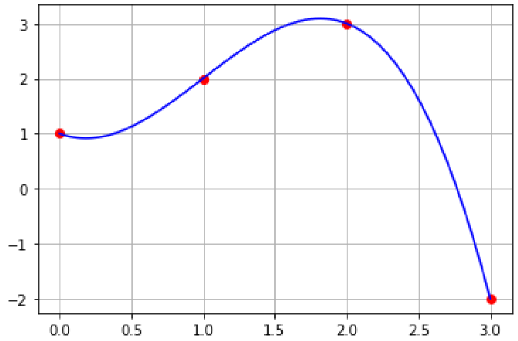
$$\begin{aligned} f_1 \lfloor x_0, x_1 \rfloor &= \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \\ f_2 \lfloor x_0, x_1, x_2 \rfloor &= \frac{f_1 \lfloor x_1, x_2 \rfloor - f_1 \lfloor x_0, x_1 \rfloor}{x_2 - x_0} \\ &\vdots \\ f_n \lfloor x_0, x_1, \cdots, x_n \rfloor &= \frac{f_{n-1} \lfloor x_1, x_2 \cdots, x_n \rfloor - f_{n-1} \lfloor x_0, x_1, \cdots, x_{n-1} \rfloor}{x_n - x_0} \end{aligned}$$

差分商と呼ばれる．得られた多項式は，Lagrange の内挿公式で得られたものと当然一致する．Newtonの内挿公式の利点は，新たなデータ点が増えたときに，新たな項を加えるだけで，内挿式が得られる点である．

In [3]:
```
# https://stackoverflow.com/questions/14823891/newton-s-interpolating-polynomial-python
# by Khalil Al Hooti (stackoverflow)


def _poly_newton_coefficient(x,y):
    """
    x: list or np array containing x data points
    y: list or np array containing y data points
    """

    m = len(x)

    x = np.copy(x)
    a = np.copy(y)
    for k in range(1,m):
        a[k:m] = (a[k:m] - a[k-1])/(x[k:m] - x[k-1])

    return a

def newton_polynomial(x_data, y_data, x):
    """
    x_data: data points at x
    y_data: data points at y
    x: evaluation point(s)
    """
    a = _poly_newton_coefficient(x_data, y_data)
    n = len(x_data) - 1 # Degree of polynomial
    p = a[n]
    for k in range(1,n+1):
        p = a[n-k] + (x -x_data[n-k])*p
    return p
```

In [4]:
```
import numpy as np
from scipy import interpolate
import matplotlib.pyplot as plt

# もとの点
x = np.array([0,1,2,3])
y = np.array([1,2,3,-2])
for i in range(0,4):
    plt.plot(x[i],y[i],'o',color='r')


print(_poly_newton_coefficient(x,y))

xx = np.linspace(0,3, 100)
yy = newton_polynomial(x, y, xx)
plt.plot(xx, yy, color = 'b')

plt.grid()
plt.show()
```

```
[ 1  1  0 -1]
```



Newton補間と多項式補間の一致の検証

関数$F(x)$をxの多項式として展開．その時の，係数の取るべき値と，差分商で得られる値が一致．

```
maple
> restart: F:=x->f0+(x-x0)*f1p+(x-x0)*(x-x1)*f2p;
```

$$F := x \mapsto f0 + (x - x0) f1p + (x - x0)(x - x1) f2p$$

```
maple
> F(x1);
  sf1p:=solve(F(x1)=f1,f1p);
```

$$f0 + (x1 - x0) f1p$$

$$sf1p := \frac{f0 - f1}{-x1 + x0}$$

f20の取るべき値の導出

```
maple
> sf2p:=solve(F(x2)=f2,f2p);
  fac_f2p:=factor(subs(f1p=sf1p,sf2p));
```

$$sf2p := -\frac{f0 + f1p\,x2 - f1p\,x0 - f2}{(-x2 + x0)(-x2 + x1)}$$

$$fac\_f2p := \frac{f0\,x1 - x2\,f0 + x2\,f1 - x0\,f1 - f2\,x1 + f2\,x0}{(-x1 + x0)(-x2 + x0)(-x2 + x1)}$$

ニュートンの差分商公式を変形

```
maple
> ff11:=(f0-f1)/(x0-x1);
  ff12:=(f1-f2)/(x1-x2);
  ff2:=(ff11-ff12)/(x0-x2);
  fac_newton:=factor(ff2);
```

$$ff11 := \frac{f0 - f1}{-x1 + x0}$$

$$ff12 := \frac{f1 - f2}{-x2 + x1}$$

$$ff2 := \frac{\frac{f0 - f1}{-x1 + x0} - \frac{f1 - f2}{-x2 + x1}}{-x2 + x0}$$

$$fac\_newton := \frac{f0\,x1 - x2\,f0 + x2\,f1 - x0\,f1 - f2\,x1 + f2\,x0}{(-x1 + x0)(-x2 + x0)(-x2 + x1)}$$

二式が等しいかどうかをevalbで判定

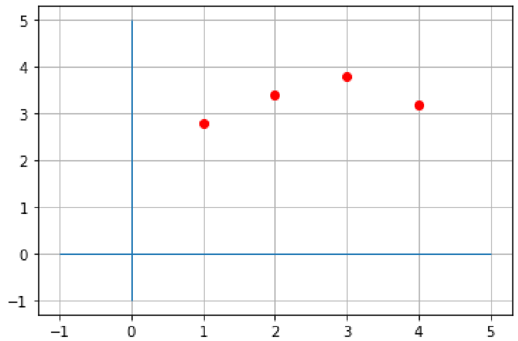
```
maple
> evalb(fac_f2p=fac_newton);
```

$$true$$

数値積分 (Numerical integration)

In [5]:

```python
%matplotlib inline

import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

x = np.array([1,2,3,4])
y = np.array([2.8,3.4,3.8,3.2])
for i in range(0,4):
    plt.plot(x[i],y[i],'o',color='r')
plt.hlines(0, -1, 5, linewidth=1)
plt.vlines(0, -1, 5, linewidth=1)
plt.grid(True)

# 数値積分の模式図
```



積分,

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

を求めよう．1次元の数値積分法では連続した領域を細かい短冊に分けて，それぞれの面積を寄せ集めることに相当する．分点の数を N とすると，

$$x_i = a + \frac{b-a}{N} i = a + h \times i$$
$$h = \frac{b-a}{N}$$

ととれる．そうすると，もっとも単純には，

$$I_N = \left\{ \sum_{i=0}^{N-1} f(x_i) \right\} h = \left\{ \sum_{i=0}^{N-1} f(a + i \times h) \right\} h$$

となる．

中点則 (midpoint rule)

中点法 (midpoint rule) は，短冊を左端から書くのではなく，真ん中から書くことに対応し，

$$I_N = \left\{ \sum_{i=0}^{N-1} f\left(a + \left(i + \frac{1}{2}\right) \times h\right) \right\} h$$

となる．

台形則 (trapezoidal rule)

さらに短冊の上側を斜めにして，短冊を台形にすれば精度が上がりそうに思う． その場合は，短冊一枚の面積S_iは，

$$S_i = \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} h$$

で求まる．これを端から端まで加えあわせると，

$$i_N = \sum_{i=0}^{N-1} S_i = h\left\{\frac{1}{2}f(x_0) + \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + \frac{1}{2}f(x_N)\right\}$$

が得られる．

Simpson(シンプソン)則

Simpson(シンプソン) 則では，短冊を2次関数，

$$f(x) = ax^2 + bx + c$$

で近似することに対応する．こうすると，

$$S_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} (ax^2 + bx + c)\,dx$$

Simpson則の導出（数式変形）：

$$\frac{h}{6}\left\{f(x_i) + 4f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) + f(x_i + h)\right\}$$

となる．これより，

$$I_N = \frac{h}{6}\left\{f(x_0) + 4\sum_{i=0}^{N-1} f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + f(x_N)\right\}$$

として計算できる．ただし，関数値を計算する点の数は台形則などの倍となっている．

教科書によっては，分割数Nを偶数にして，点を偶数番目 (even) と奇数番目 (odd) に分けて，

$$I_N = \frac{h}{3}\left\{f(x_0) + 4\sum_{i=even}^{N-2} f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) + 2\sum_{i=odd}^{N-1} f(x_i) + f(x_N)\right\}$$

としている記述があるが，同じ計算になるので誤解せぬよう．

数値積分のコード

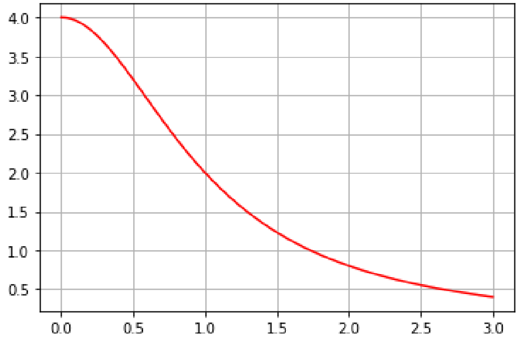
次の積分を例に，pythonのコードを示す．

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\,dx$$

先ずは問題が与えられたらできるだけお任せで解いてしまう．答えをあらかじめ知っておくと間違いを見つけるのが容易．プロットしてみる．

scipyで積分計算をお任せでしてくれる関数はquadで，これはFortran libraryのQUADPACKを利用している．自動で色々してくれるが，精度は1.49e_08以下．

In [6]:
```
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy import integrate

def func(x):
   return 4.0/(1.0+x**2)

x = np.linspace(0,3, 100)
y = func(x)

plt.plot(x, y, color = 'r')

plt.grid()
plt.show()

print(integrate.quad(func, 0, 1))
```



(3.141592653589793 6, 3.4878684980086326e-14)

なんでと思うかもしれないが，

```
maple
>int(1/(1+x^2),x);
```

$$arctan(x)$$

となるので，納得できるでしょう．

Midpoint rule(中点法)

In [7]:
```
def func(x):
   return 4.0/(1.0+x**2)

N, x0, xn = 8, 0.0, 1.0

h = (xn-x0)/N
S = 0.0
for i in range(0, N):
   xi = x0 + (i+0.5)*h
   dS = h * func(xi)
   S = S + dS
```

```
print(S)
```

3.142894729591689

Trapezoidal rule(台形公式)

In [8]:
```
def func(x):
    return 4.0/(1.0+x**2)

N, x0, xn = 8, 0.0, 1.0

h = (xn-x0)/N
S = func(x0)/2.0
for i in range(1, N):
    xi = x0 + i*h
    dS = func(xi)
    S = S + dS
    print("{0}".format(i))

S = S + func(xn)/2.0
print(h*S)
```

1
2
3
4
5
6
7
3.138988494491089

Simpson's rule(シンプソンの公式)

In [9]:
```
def func(x):
    return 4.0/(1.0+x**2)

N, x0, xn = 8, 0.0, 1.0

M = int(N/2)
h = (xn-x0)/N
Seven, Sodd = 0.0, 0.0
for i in range(1, 2*M, 2): #rangeの終わりに注意
    xi = x0 + i*h
    Sodd += func(xi)
    print("{0}".format(i))
for i in range(2, 2*M, 2):
    xi = x0 + i*h
    Seven += func(xi)
    print("{0}".format(i))

print(h*(func(x0)+4*Sodd+2*Seven+func(xn))/3)
```

1
3
5
7
2
4
6
3.141592502458707

課題

補間法

次の4点

```
maple
x y
0 1
1 2
2 3
3 1
```

を通る多項式を逆行列で求めよ.

対数関数のニュートンの差分商補間(2014期末試験, 25点)

2を底とする対数関数(Mapleでは$\log[2](x)$)の$F(9.2) = 2.219203$をニュートンの差分商補間を用いて求める．ニュートンの内挿公式は,

$$\begin{aligned} F(x) \quad &= F(x_0) + (x-x_0) f_1\lfloor x_0, x_1 \rfloor + (x-x_0)(x-x_1) f_2\lfloor x_0, x_1, x_2 \rfloor + \\ &\cdots + \prod_{i=0}^{n-1}(x-x_i)\, f_n\lfloor x_0, x_1, \cdots, x_n \rfloor \end{aligned}$$

である．ここで$f_i\lfloor\ \rfloor$は次のような関数を意味していて,

$$\begin{aligned} f_1\lfloor x_0, x_1 \rfloor \quad &= \quad \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \\ f_2\lfloor x_0, x_1, x_2 \rfloor \quad &= \quad \frac{f_1\lfloor x_1, x_2 \rfloor - f_1\lfloor x_0, x_1 \rfloor}{x_2 - x_0} \\ &\vdots \\ f_n\lfloor x_0, x_1, \cdots, x_n \rfloor \quad &= \quad \frac{f_{n-1}\lfloor x_1, x_2 \cdots, x_n \rfloor - f_{n-1}\lfloor x_0, x_1, \cdots, x_{n-1} \rfloor}{x_n - x_0} \end{aligned}$$

差分商と呼ばれる．$x_k = 8.0, 9.0, 10.0, 11.0$をそれぞれ選ぶと，差分商補間のそれぞれの項は以下の通りとなる．

k	x_k	$y_k = F_0(x_k)$	$f_1\lfloor x_k, x_{k+1} \rfloor$	$f_2\lfloor x_k, x_{k+1}, x_{k+2} \rfloor$	$f_3\lfloor x_k, x_{k+1}, x_{k+2}, x_{k+3} \rfloor$
0	8.0	2.079442			
			0.117783		
1	9.0	2.197225		$[XXX]$	
			0.105360		0.0003955000
2	10.0	2.302585		−0.0050250	
			0.095310		
3	11.0	2.397895			

それぞれの項は，例えば,

$$f_2\lfloor x_1, x_2, x_3 \rfloor = \frac{0.095310 - 0.105360}{11.0 - 9.0} = -0.0050250$$

で求められる．ニュートンの差分商の一次多項式の値はx=9.2で

$$F(x) = F_0(8.0) + (x - x_0) f_1 \lfloor x_1, x_0 \rfloor = 2.079442 + 0.117783(9.2 - 8.0) = 2.220782$$

となる．

差分商補間の表中の開いている箇所[XXX]を埋めよ．

ニュートンの二次多項式

$$F(x) = F(x_0) + (x - x_0) f_1 \lfloor x_0, x_1 \rfloor + (x - x_0)(x - x_1) f_2 \lfloor x_0, x_1, x_2 \rfloor$$

の値を求めよ．

ニュートンの三次多項式の値を求めよ．

ただし，ここでは有効数字7桁程度はとるように．(E.クライツィグ著「数値解析」(培風館,2003), p.31, 例4改)

数値積分(I)

次の関数

$$f(x) = \frac{4}{1 + x^2}$$

を$x = 0..1$で数値積分する．

1. Nを2,4,8,...256ととり，N個の等間隔な区間にわけて中点法と台形則で求めよ．(15)
2. 小数点以下10桁まで求めた値3.141592654との差をdXとする．dXと分割数Nとを両対数プロット(loglogplot)して比較せよ(10) (2008年度期末試験)

解答例[7.3]

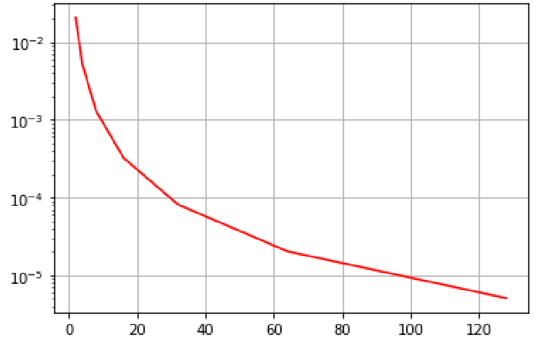
以下には，中点則の結果を示した．課題では，台形則を加えて，両者を比較せよ．予測とどう違うか．

In [10]:

```
import numpy as np

def func(x):
    return 4.0/(1.0+x**2)

def mid(N):
    x0, xn = 0.0, 1.0

    h = (xn-x0)/N
    S = 0.0
    for i in range(0, N):
        xi = x0 + (i+0.5)*h
        dS = h * func(xi)
        S = S + dS
    return S

x, y = [], []
for i in range(1,8):
    x.append(2**i)
    y.append(abs(mid(2**i)-np.pi))
```

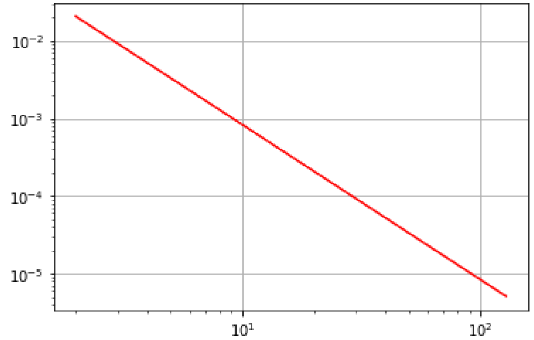
In [11]:

```
plt.plot(x, y, color = 'r')
plt.yscale('log')
plt.grid()
plt.show()
```



In [12]:

```
plt.plot(x, y, color = 'r')
plt.yscale('log')
plt.xscale('log')
plt.grid()
plt.show()
```



In [ ]: